Noise-contrastive estimation of normalising constants and GANs

Contents

| 1 | | ctions génériques |
|----------|-----|---|
| | 1.1 | Algorithme d'Hasting |
| | | MC MLE (Geyer) |
| | | NCE (Gutmann) |
| | 1.4 | Graphiques |
| 2 | App | plications |
| | 2.1 | Exemple basique : la loi normale |
| | | Modèle d'Ising |
| 3 | Not | ivelles approches |
| | 3.1 | Bootstrap |
| | 3.2 | Récursivité |
| | 3.3 | Hasting iid |
| | 3.4 | Reverse logistic regression : deux lois de même famille |
| | | Reverse logistic regression : deux lois de familles différentes |

1 Fonctions génériques

```
# Palettes

pal5 = c("#3B9AB2", "#78B7C5", "#EBCC2A", "#E1AF00", "#DC863B")

pal4 = c("#3B9AB2", "#78B7C5", "#EBCC2A", "#DC863B")

pal2 = c("#3B9AB2", "#DC863B")

pal3 = c("#3B9AB2", "#EBCC2A", "#DC863B")
```

1.1 Algorithme d'Hasting

Utilité : simuler selon $p_m(., \psi)$ pour un paramètre ψ choisi.

| Argument | Type | Exemple | Indication |
|----------|----------|-----------------------|--|
| X | vecteur | reauchy $(100, 0, 1)$ | notre échantillon de densité inconnue |
| n | entier | 100 | taille de la simulation |
| psi | vecteur | c(0,1) | paramètres de la fonction h |
| h | fonction | | fonction qui retourne $\overline{p_m}(.,\psi)$ |

Ci-dessous une autre version qui génère un échantillon iid.

| Argument | Type | Exemple | Indication |
|------------|----------|-----------------------|--|
| X | vecteur | reauchy $(100, 0, 1)$ | notre échantillon de densité inconnue |
| n | entier | 100 | taille de la simulation |
| psi | vecteur | c(0,1) | paramètres de la fonction h |
| h | fonction | | fonction qui retourne $\overline{p_m}(.,\psi)$ |
| ϵ | Entier | 2 | pas de décorrélation $\overline{p_m}(.,\psi)$ |

```
/(h(y[i-1],psi) * dnorm(y[i-1], y_, 1))
){
    y = append(y, y_)}
else {
    y = append(y, y[i-1])
    }
}
filter = y * rep(c(1,rep(0, eps-1)), n)
return (filter[filter != 0])
}
```

1.2 MC MLE (Geyer)

Utilité : retourne une estimation des paramètres selon la méthode décrite dans le papier de Geyer.

```
mc_mle = function(x, n, psi, h){
    m = length(x)
    y = hasting(x, n, psi, h)
    L = function(theta){
        return(sum(log(h(x,theta)/h(x,psi))) - m*log(mean(h(y,theta)/h(y,psi))))
}

theta = optim(
    par = rep(1,length(psi)),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = L
) *par

return(theta)
}
```

1.3 NCE (Gutmann)

Utilité : Retourne l'estimation de la constante et des paramètres.

| Argument | Type | Exemple | Indication |
|------------|----------|-----------------------|---|
| X | vecteur | reauchy $(100, 0, 1)$ | notre échantillon de densité inconnue |
| law_y | fonction | rnorm | fonction qui retourne un échantillon suivant la loi p_n |
| n | entier | 100 | taille de l'échantillon de bruit suivant la loi p_n |
| params_y | vecteur | c(0,1) | arguments de la fonction law_y |
| log_pm | fonction | | fonction qui retourne le logarithme de la densité p_m |
| log_pn | fonction | | fonction qui retourne le logarithme de la densité p_n |
| size_theta | entier | 3 | taille de θ , vaut habituellement 2 ou 3 |

```
nce = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n){
    y = do.call(law_y, c(list(n),params_y))
    m = length(x)
```

```
h = function(u, theta){
    return( 1 / (1 + n/m * exp(log_pn(u) - log_pm(u, theta))))
}

J = function(theta){
    return( sum(log(h(x, theta))) + sum(log(1 - h(y, theta))) )
}

theta = optim(
    par = rep(1, size_theta),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = J
)$par

return(c(theta[-size_theta], exp(-theta[size_theta])))
}
```

1.4 Graphiques

Utilité : afficher l'histogramme pour un échantillon de données x.

Utilité : pour NCE, afficher l'évolution des paramètres au fur et à mesure de l'augmentation de n (la dimension de l'échantillon de bruit)

```
NCE_evol_params = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, ratio, steps, labels) {
    # Creation de l'abscisse
    m = length(x)
    N = seq(0, m*ratio, length.out = steps + 1)

    # Creation de l'ordonnée
    theta = c()
    for (n in N) {
        theta = append(theta, nce(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n))
    }

# Formatage des données
    theta = t(rbind(matrix(theta, nrow = size_theta),N))
    df = as.data.frame(theta)
    df_melted = melt(df, id.vars = "N")

# Plot
    plot_df = ggplot(df_melted, aes(x = N, y = value)) +
    geom_line(aes(color = variable, group = variable)) +
```

Note : il faudrait optimiser le temps de calcul de ces fonctions, peut-être en matriciel au lieu des boucles ou bien avec du calcul en parralèle sur $\mathrm{CPU}/\mathrm{GPU}$

2 Applications

2.1 Exemple basique : la loi normale

Soit x l'échantillon de taille m obtenu selon la loi de densité inconnue p_d .

On considère ici que p_d appartient à la famille de fonctions paramétrées par $\theta = (c, \mu, \sigma)$ suivante :

$$p_m(u;\theta) = \frac{1}{Z(\mu,\sigma)} \times exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{u-\mu}{\sigma} \right)^2 \right] \quad \text{d'où} \quad ln(p_m(u;\theta)) = c - \frac{1}{2} \left(\frac{u}{\sigma} - \frac{\mu}{\sigma} \right)^2$$

```
pm_barre = function(u, theta){
    return(exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
}

log_pm = function(u, theta){
    return(theta[3] - 1/2 * (u/theta[2] - theta[1]/theta[2]) ** 2)
    # theta[1] = mu / theta[2] = sigma / theta[3] = c
}

log_pn_cauchy = function(u){
    return(log(dcauchy(u, mean(x), sd(x))))
}

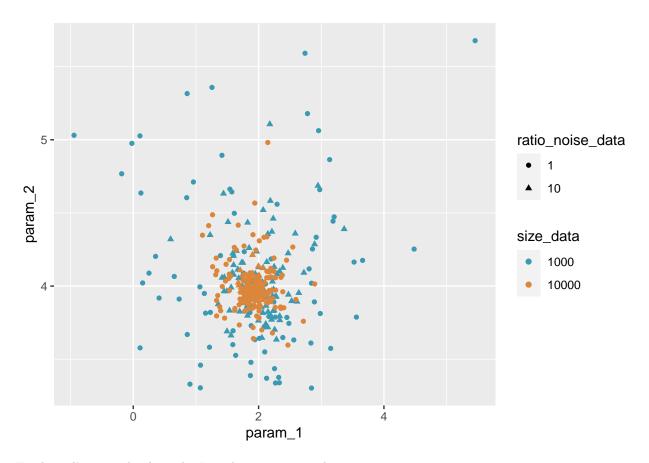
m = 10000
    n = 10000
    x = rnorm(m, 2, 4)
    size_theta = 3

# METHODE MC MLE
mc_mle(x, n, c(mean(x), sd(x)), pm_barre)
```

[1] 1.977665 4.518726

Etudions l'impact de la dimension des échantillons sur la convergence des estimateurs.

```
ggplot(df_mcmle_filt, aes(x = param_1, y = param_2, color = size_data, shape = ratio_noise_data)) + geo
```

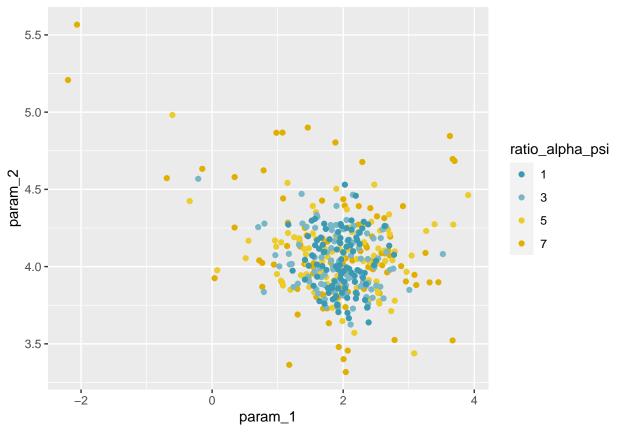


Etudions l'impact du choix de ψ sur la convergence des estimateurs.

```
df_mcmle_psi <- read_csv("df_mcmle_psi.csv")[,-1]

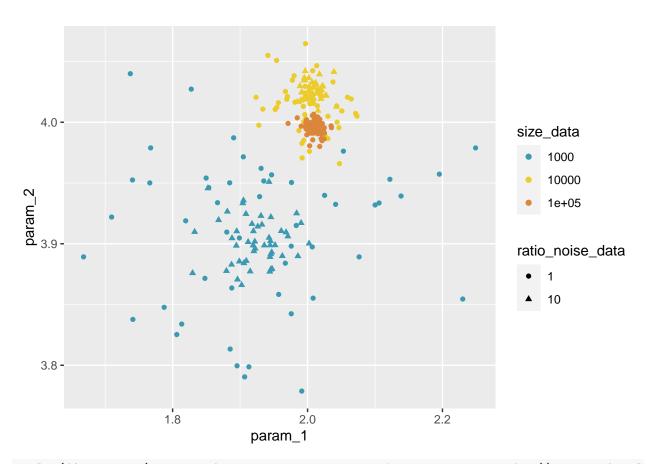
df_mcmle_psi = df_mcmle_psi[order(-df_mcmle_psi$ratio_alpha_psi),]

df_mcmle_psi$ratio_alpha_psi = as.factor(df_mcmle_psi$ratio_alpha_psi)
ggplot(df_mcmle_psi, aes(x = param_1, y = param_2, color = ratio_alpha_psi)) + geom_point() + scale_col</pre>
```

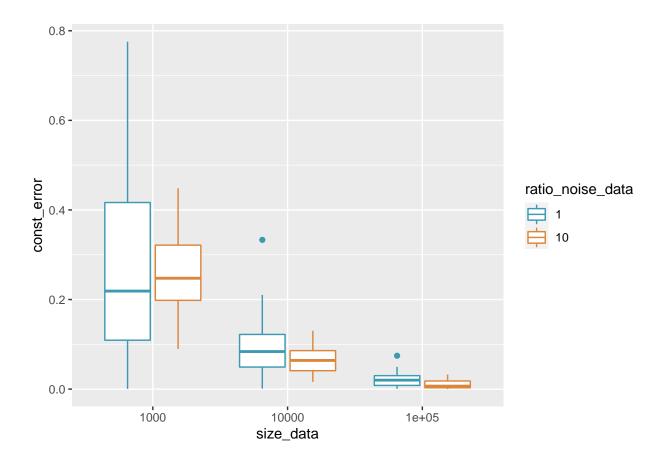


METHODE NCE nce(x, rcauchy, c(mean(x),sd(x)), log_pm, log_pn_cauchy, size_theta, n)

[1] 2.000849 4.041010 10.223954
ggplot(df_nce, aes(x = param_1, y = param_2, color = size_data, shape = ratio_noise_data)) + geom_point

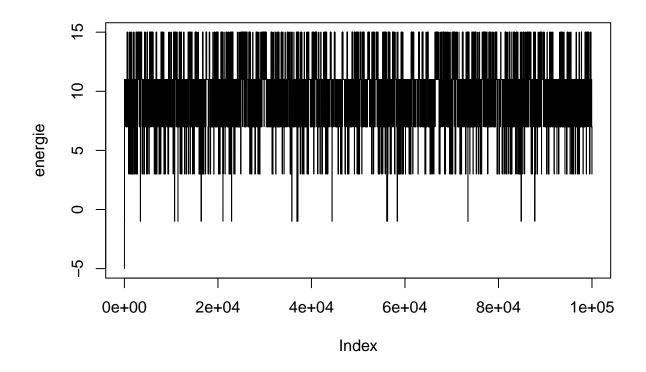


 $\texttt{ggplot}(\texttt{df_nce, aes}(\texttt{x = size_data, y = const_error, color = ratio_noise_data})) + \texttt{geom_boxplot}() + \texttt{scale_data})$



2.2 Modèle d'Ising

```
library('isingLenzMC')
        = 0.9
                          # paramètre de temperature
beta
       = 15
                          # nombre de sites
config1 = rep(1,n)
                          # generer une configuration à n sites
config = genConfig1D(n) # generer une configuration à n sites aléatoirement
energie = c()
iter = 100000
data = matrix(nrow= iter, ncol = n)
for (k in 1:iter){
  # on tire successivement des configurations jusqu'à obtenir convergence du niveau d'énergie
  #ce que l'on observera graphiquement
  config = isStep1D(beta, config, 1.0, 0.0, 1)$vec # tirage avec Metropolis
  data[k,] = config
  energie = c(energie,lattice1DenergyNN(config))
plot(energie, type ='l')
```



On définit la fonction coeur qui est à une constante de normalisation près la mesure de Gibbs associée à au modèle d'Ising de paramètre β . On définit la fonction ising1D(n) qui est rend toutes les configurations de spins possibles d'un modèle d'Ising unidimensionnel à n sites.

```
coeur = function(constante_normalisation,beta=0.9,config){
  # constante_normalisation : fonction de partition inconnue
  # beta
                            : paramètre de température
                            : une configuration de spins
  # confiq
  # Lorsque 'constante_normalisation' == vraie valeur de la fonction de partition pour le paramètre bet
          alors return la probabilité de la configuration de spins 'config'
  return ( exp(-beta*lattice1DenergyNN(config))/constante_normalisation )
}
ising1D = function(n){
  # n : nombre de sites pour une configuration
  # return l'ensemble des configuration 1D possibles dans une matrice
  # chaque ligne correspond à une configuration possible
  if (n==1)
    {
    return(matrix(c(1,-1),nrow=2))
```

Il se peut qu'il y ait conflit de notations pour cette sous section d'Ising avec les notations du précédent exemple. De plus, il y'a une erreur en sortie que je n'arrive pas résoudre pour l'instant. Mais je ne pense pas qu'elle soit très compliquée...

```
log_pn = function(u,param_pn){
   \textit{\# pn densite iid N(param\_pn[1],param\_pn[2]) de taille length(u) } \\
  # Verifier que c'est bien ce qui est codé
      = length(u)
  log_d = 0
  for (k in 1:n){ log_d = log_d - 0.5 * ((u[k] - param_pn[1]) / param_pn[2]) ** 2 }
  return(-0.5*n*log(2*pi*(param_pn[2]**2)) + log_d)
log_pm = function(configuration, beta, theta){
  # theta = -log(Z)
  \# interraction entre sites = 1 et avec le champs extérieure = 0
  return ( -beta*totalEnergy1D(configuration,1,0) + theta )
nce_ising = function(matrix_ising,beta,log_pm,theta,law_pn,param_pn,log_pn,b_size){
  # matrix_ising = matrice ou en ligne sont rangées les observations d'Ising en 1D
  # beta
                 = paramètre de température de modèle d'Ising \in ]0,1[
                 = logarithme de la densité d'Ising
  # log_pm
  # theta
                 = paramètre à optimiser , en lien avec la constante de normalisation
  # law_pn = loi du bruit qui doit contenir dans son support {0,1}
  # param_pn = paramètres de la loi law_pn
  \# log_pn = log de la densité de pn
  # b_size = nombre d'observation du bruit, à ne pas confondre avec la taille d'une observation du bru
n = dim(matrix_ising)[2] # n = nombre de sites pour les observations d'Ising en 1D
```

```
= dim(matrix_ising)[1] # m = nombre d'observations d'Ising en 1D
  bruit = matrix(do.call(law_pn,c(list(b_size*n),param_pn)),ncol=n) # échantillon de vecteurs de bruit
  h = function(configuration, theta) {return(1 / (1 + b_size/m * exp(log_pn(configuration, param_pn) - log
  J = function(theta){
   # x vecteur de densite inconnue
    # y vecyeur de bruit
    objectif = 0
    for (k in 1:m){objectif = objectif + log(h(matrix_ising[k,],theta)) } # composante de l'objectif
    for (k in 1:b_size){objectif = objectif + log(1 - h(bruit[k,],theta)) } # composante de l'objectif
    return( objectif )
    }
  solution = optimize(f = J,
                      interval = c(-1e5, 1e5),
                      maximum = FALSE)
  return(exp(-solution))
            = 10
matrix_ising = ising1D(n)[100:900,]
beta
            = 0.9
            = 1
theta
law_pn
            = rnorm
            = c(0,1)
param_pn
            = 2**n
b_size
nce_ising(matrix_ising,beta,log_pm,theta,law_pn,param_pn,log_pn,b_size)
```

3 Nouvelles approches

3.1 Bootstrap

```
# Calcul de {size_boot} estimateurs par bootstrap
NCE_bootstrap = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n, size_boot, labels) {
  m = length(x)
  theta_bootstrap = c()
  x_bootstrap = x
  for (i in 1:size_boot) {
   theta_bootstrap = append(theta_bootstrap, nce(x_bootstrap,
                                                  law_y,
                                                  params_y,
                                                  log_pm,
                                                  log_pn,
                                                  size_theta,
   x_bootstrap = sample(x, size = m, replace=TRUE)
 return(matrix(theta_bootstrap, nrow = size_theta))
# Plot la moyenne empirique des estimateurs bootstrap en fonction du nombre d'estimateurs
NCE_bootstrap_plot = function(matrix_theta_bootstrap) {
  # Formatage des données pour plot
  array_boot = 1:length(matrix_theta_bootstrap[1,])
  df = as.data.frame(cbind(t(rowCumsums(matrix_theta_bootstrap))/array_boot,array_boot))
  df_melted = melt(df, id.vars = "array_boot")
  # Plot
  plot_df = ggplot(df_melted, aes(x = array_boot, y = value)) +
  geom_line(aes(color = variable, group = variable)) +
  labs(title = "Evolution des paramètres par bootstrap",
       x = "Taille du bootstrap",
       y = "Paramètres",
       color = "Légende") +
  scale_color_manual(labels = labels, values = c("blue", "red", "orange"))
 print(plot_df)
# etude bootstrap de l'estimateur
bootstrap = function(matrix, alpha){
 return(data.frame(
   theta = matrix_theta_bootstrap[,1],
   biais = rowMeans(matrix_theta_bootstrap) - matrix_theta_bootstrap[,1],
   IC = rowQuantiles(matrix_theta_bootstrap, probs = c(alpha/2, 1-alpha/2))
 ))
}
x_{test} = rnorm(1000, 2, 4)
matrix_theta_bootstrap = NCE_bootstrap(x_test, rcauchy, c(mean(x_test), sd(x_test)), log_pm, log_pn_cauchy
```

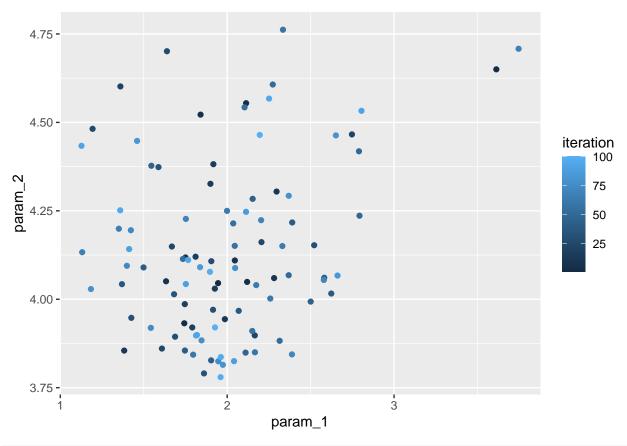
kable(bootstrap(matrix_theta_bootstrap, 0.05))

| theta | biais | IC.2.5. | IC.97.5. |
|----------------------|-------------------------|----------------------|------------------------|
| 2.198399 4.119662 | -0.1821649 0.0269457 | 1.717030 3.981323 | $2.181575 \\ 4.350358$ |
| 10.362192 | -0.1869283 | 9.727845 | 10.746972 |

3.2 Récursivité

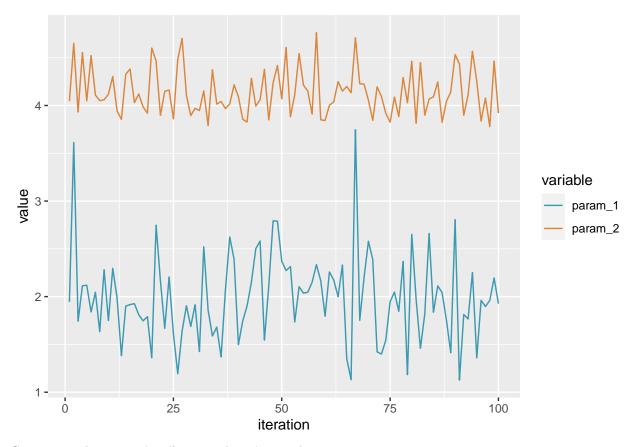
Utilité : améliorer récursivement la précision de l'estimation via les estimations précédentes

```
df_recurs_naif <- read_csv("df_recurs_naif.csv")[,-1]
ggplot(df_recurs_naif, aes(x = param_1, y = param_2, color = iteration)) + geom_point()</pre>
```



```
df_recurs_naif <- read_csv("df_recurs_naif.csv")[,-1]
colnames(df_recurs_naif) = c("iteration", "param_1", "param_2")

df_recurs_naif_melted = melt(df_recurs_naif, id.vars = "iteration")
ggplot(df_recurs_naif_melted, aes(x = iteration, y = value)) + geom_line(aes(color = variable, group = variable))</pre>
```



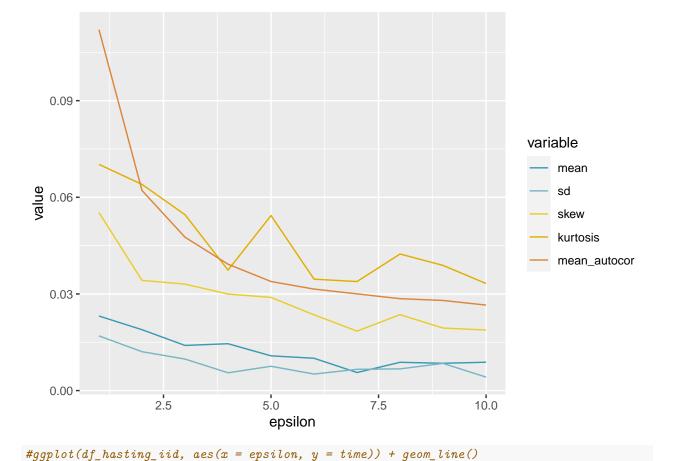
Cette approche naïve n'améliore pas la précision de notre estimation.

Nouvelle approche à venir.

3.3 Hasting iid

Afin de pouvoir appliquer numériquement la méthode de Reverse logistic regression, on aurait besoin de savoir simuler un échantillon iid suivant une loi dont on ne connait pas la constante de normalisation. L'idée est d'utiliser l'algorithme d'Hasting et de ne conserver qu'un échantillon tous les ϵ pas. Le code est en haut de ce document.

Etude de l'impact du choix du pas.



 $\epsilon=2$ semble être un bon choix au regard du gain en terme d'auto-corrélation et du temps de calcul.

3.4 Reverse logistic regression : deux lois de même famille

La maximisation de la fonction objectif

$$l_n(\eta) = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n_j} log(p_j(X_{i,j}, \eta))$$

permet d'estimer les η (qui sont fonction des constantes de normalisation des h_j). On utilise les notations suivantes :

$$\eta_j = -log(Z_j) + log(\frac{n_j}{n})$$
 avec Z_j la constante de normalisation de h_j

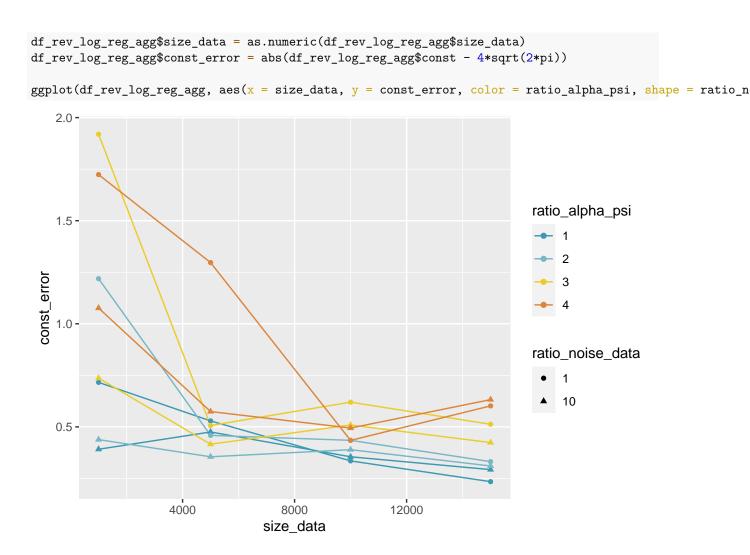
$$h_j(x)e^{\eta_j}$$

$$p_j(x) = \frac{h_j(x)e^{\eta_j}}{\sum_{k=1}^m h_k(x)e^{\eta_k}}$$

Exemple avec $m=2, n=n_1+n_2=1000+1000$, et pour coller avec les méthodes différentes on va prendre h_1 la densité non normalisée d'une $\mathcal{N}(\alpha)$ dont on a estimé α par MC MLE et h_2 la densité non normalisée d'une $\mathcal{N}(\psi)$ avec ψ qu'on choisit.

```
rev_log_reg = function(x, alpha, n, psi, h, eps){
  m = length(x)
  y = hasting_iid(x, n, psi, h, eps)
```

```
# calcul des probabilités p j
  denom = function(sample, eta) {
    return(pm_barre(sample, alpha)*exp(eta[1]) + pm_barre(sample,psi)*exp(eta[2]))}
  p 1 = function(sample, eta){
    return (pm_barre(sample, alpha)*exp(eta[1]) / denom(sample, eta))}
  p_2 = function(sample, eta){
    return (pm_barre(sample, psi)*exp(eta[2]) / denom(sample, eta))}
  # fonction objectif
  L = function(eta) {
    return(sum(log(p_1(x, eta))) + sum(log(p_2(y, eta)))))
  # initialisation descente de gradient
  eta1 = -\log(sd(x)*sqrt(2*pi)) + \log(m/(m+n))
  eta2 = -\log(sd(y)*sqrt(2*pi)) + \log(n/(m+n))
  # optimisation
  const = optim(
   par = c(eta1, eta2),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
   fn = L
  )$par
 a = \exp(-\text{const}[1] + \log(m/(m+n)))
 return(a)
pm_barre = function(u, theta){
 return(exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
}
m = 1000
n = 10000
x = rnorm(m, 2, 4)
psi = c(mean(x), sd(x))
alpha = mc_mle(x, n, psi, pm_barre)
print(alpha)
## [1] 3.120086 4.437561
print(rev_log_reg(x, alpha, n, c(8,8), pm_barre, 2))
## [1] 8.98938
Etude de l'impact de la dimension, du ratio et des paramètres sur la convergence de la constante.
df_rev_log_reg <- read_csv("df_rev_log_reg.csv")[,-1]</pre>
df_rev_log_reg_agg = aggregate(const ~ size_data + ratio_noise_data + ratio_alpha_psi,
                    data = df_rev_log_reg,
                    FUN = mean)
df_rev_log_reg_agg$ratio_alpha_psi = as.factor(df_rev_log_reg_agg$ratio_alpha_psi)
df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data = as.factor(df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data)
```



3.5 Reverse logistic regression : deux lois de familles différentes

On reprend les notations ci-dessus (notations du papier). Exemple avec m=2, $n=n_1+n_2$, et pour coller avec les méthodes différentes on va prendre h_1 la densité non normalisée d'une $\mathcal{N}(\alpha)$ dont on a estimé α par MC MLE et h_2 la densité d'une loi usuelle, on en connait donc la constante de normalisation. On note ψ le paramètre de cette loi usuelle.

```
rev_log_reg_with_noise = function(x, law_noise, n, alpha, psi, h1, h2){

y = do.call(law_noise, c(list(n),psi))
m = length(x)

# calcul des probabilités p_j
denom = function(sample, eta) {
    return(h1(sample, alpha)*exp(eta[1]) + h2(sample,psi[1],psi[2])*exp(eta[2]))}
p_1 = function(sample, eta) {
    return (h1(sample, alpha)*exp(eta[1]) / denom(sample, eta))}
p_2 = function(sample, eta) {
    return (h2(sample, psi[1],psi[2])*exp(eta[2]) / denom(sample, eta))}

# fonction objectif
```

```
L = function(eta) {
    return(sum(log(p_1(x, eta))) + sum(log(p_2(y, eta)))))
  # initialisation descente de gradient
  eta1 = -\log(sd(x)*sqrt(2*pi)) + \log(m/(m+n))
  eta2 = -\log(sd(y)*sqrt(2*pi)) + \log(n/(m+n))
  # optimisation
  const = optim(
   par = c(eta1, eta2),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = L
  )$par
  b = \exp(-\text{const}[2] + \log(m/(m+n)))
  a = \exp(-\text{const}[1] + \log(m/(m+n)))
  # la constante de h_2 vaut normalement 1 si h_2 est une loi de densité, donc b est exactement le coef
  return(a/b*m/n)
pm_barre = function(u, theta){
  return(\exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
m = 1000
n = 10000
x = rnorm(m, 2, 4)
psi = c(mean(x), sd(x))
alpha = mc_mle(x, n, psi, pm_barre)
print(alpha)
## [1] 1.886874 4.009812
rev_log_reg_with_noise(x, reauchy, n, c(2,4), c(mean(x),sd(x)), pm_barre, dcauchy)
## [1] 10.03673
df_rev_log_reg_noise <- read_csv("df_rev_log_reg_noise.csv")[,-1]</pre>
df_rev_log_reg_agg = aggregate(const ~ size_data + ratio_noise_data + law_noise,
                    data = df_rev_log_reg_noise,
                    FUN = mean)
df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data = as.factor(df_rev_log_reg_agg$ratio_noise_data)
df_rev_log_reg_agg$size_data = as.numeric(df_rev_log_reg_agg$size_data)
df_rev_log_reg_agg$const_error = abs(df_rev_log_reg_agg$const - 4*sqrt(2*pi))
ggplot(df_rev_log_reg_agg, aes(x = size_data, y = const_error, color = law_noise, shape = ratio_noise_d
```

